

Determination and Correlation of the Solubility for Taurine in Water and Organic Solvents Systems

Jiao Yang, Cai-Rong Zhou*, Xiao-Hua Shi

School of Chemical Engineering, Zhengzhou University, 450001, Zhengzhou, Henan, People's Republic of China

*Corresponding author. Email: zhoucairong@zzu.edu.cn

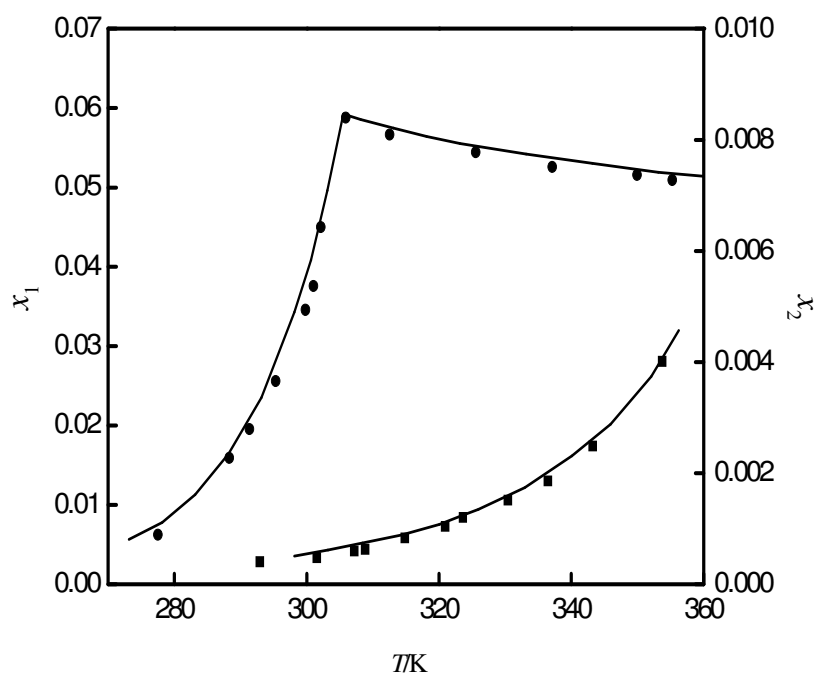


Figure SI 1. Comparison of mole fraction solubility x from $T = (273.05 \text{ to } 354.05) \text{ K}$ between this work and the literature: x_1 , ●, sodium sulfate; x_2 , ■, benzoic acid; —, literature.

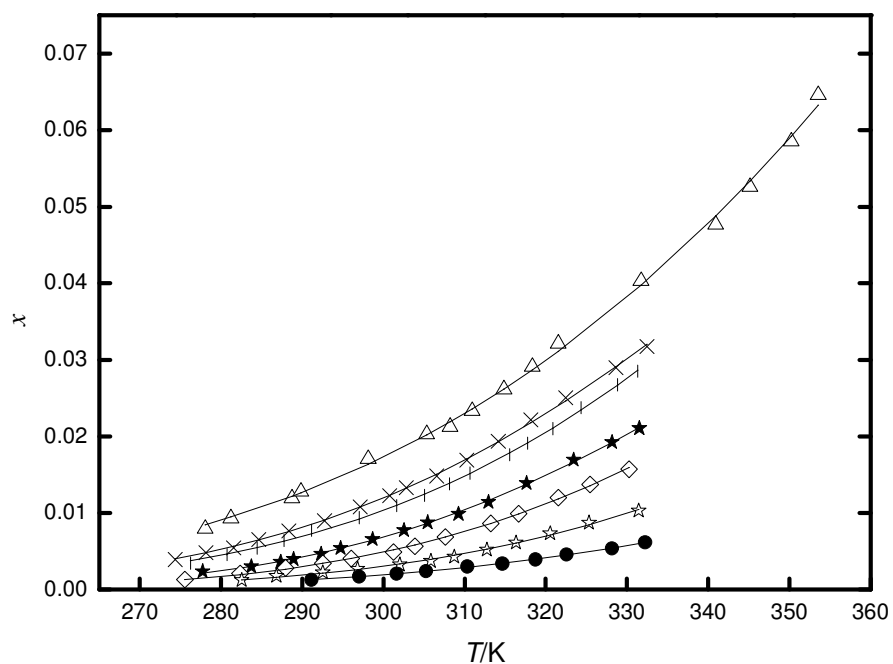


Figure SI 2. Mole fraction solubility x of taurine obtained from the experiment and the correlation of Apelblat equation in different volume fractions Φ_2 of water(1) + methanol(2) solution from $T = (274.05 \text{ to } 353.05) \text{ K}$: $\triangle$, water; $\times$, $\Phi_2=0.05$; $|$, $\Phi_2=0.10$; $\star$, $\Phi_2=0.20$; $\diamond$, $\Phi_2=0.30$; $\star$, $\Phi_2=0.40$; $\bullet$, $\Phi_2=0.50$; —, calculated values from the Apelblat equation at corresponding temperature.

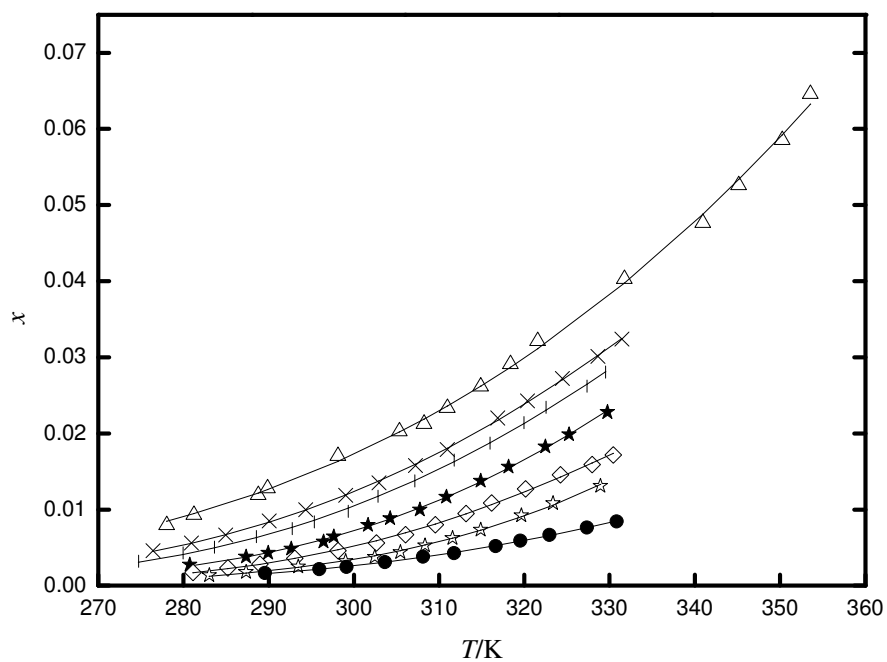


Figure SI 3. Mole fraction solubility x of taurine obtained from the experiment and the correlation of Apelblat equation in different volume fractions Φ_2 of water(1) + 2-propanol(2) solution from $T = (274.05 \text{ to } 353.05) \text{ K}$: $\triangle$, water; $\times$, $\Phi_2=0.05$; $|$, $\Phi_2=0.10$; $\star$, $\Phi_2=0.20$; $\diamond$, $\Phi_2=0.30$; $\star$, $\Phi_2=0.40$; $\bullet$, $\Phi_2=0.50$; —, calculated values from the Apelblat equation at corresponding temperature.

Table SI 1 Mole fraction solubility of taurine obtained from the correlation of models in water and the mixture of water(1) +methanol or + ethanol or + 2-propanol(2) in the temperature range of (274.05 to 353.05) K: Φ_2 , volume fractions of methanol, ethanol or 2-propanol in the mixture; $x(\text{alp})$, $x(\text{sim})$, $x(\lambda\text{h})$ are the mole fraction solubility correlated with Apelblat equation, simplified model of ideal solution the λh equation, respectively; ARD, the average relative deviation.

Solvent	T/K	$10x(\text{alp})$	$10x(\text{sim})$	$10x(\lambda\text{h})$
Water	278.05	0.0846	0.0884	0.0880
	281.25	0.0947	0.0982	0.0978
	288.75	0.1219	0.1245	0.1242
	289.85	0.1263	0.1287	0.1285
	298.15	0.1636	0.1648	0.1646
	305.35	0.2020	0.2019	0.2019
	308.25	0.2191	0.2185	0.2185
	310.95	0.2360	0.2349	0.2350
	314.85	0.2619	0.2603	0.2604
	318.35	0.2869	0.2847	0.2849
	321.55	0.3110	0.3085	0.3088
	331.75	0.3974	0.3944	0.3948
	340.95	0.4880	0.4861	0.4864
	345.15	0.5335	0.5328	0.5329
	350.25	0.5922	0.5938	0.5937
	353.55	0.6324	0.6359	0.6355
	100ARD	0.3517	0.9692	0.8997
$\Phi_2=0.05$				
Water(1) + Methanol(2)	274.35	0.0400	0.0450	0.0447
	278.15	0.0481	0.0525	0.0523
	281.55	0.0563	0.0601	0.0599
	284.65	0.0647	0.0678	0.0676
	288.35	0.0758	0.0780	0.0778
	292.75	0.0908	0.0917	0.0916
	297.15	0.1077	0.1074	0.1073
	300.75	0.1231	0.1217	0.1217
	302.85	0.1327	0.1307	0.1308
	306.55	0.1508	0.1480	0.1481
	310.25	0.1705	0.1670	0.1671
	314.15	0.1929	0.1891	0.1893
	318.15	0.2176	0.2141	0.2144
	322.45	0.2462	0.2439	0.2441
	328.65	0.2910	0.2926	0.2926
	332.45	0.3205	0.3260	0.3258
	100ARD	0.3285	2.1065	1.9901
$\Phi_2=0.10$				
	276.25	0.0374	0.0403	0.0401

Solvent	T/K	$10x(\text{alp})$	$10x(\text{sim})$	$10x(\lambda h)$
Water(1) + Methanol(2)	280.75	0.0462	0.0487	0.0485
	284.45	0.0546	0.0567	0.0565
	287.75	0.0631	0.0647	0.0646
	291.15	0.0728	0.0739	0.0738
	297.05	0.0923	0.0925	0.0924
	301.65	0.1100	0.1094	0.1094
	305.05	0.1246	0.1235	0.1235
	308.15	0.1391	0.1375	0.1376
	310.65	0.1516	0.1498	0.1500
	315.55	0.1784	0.1765	0.1766
	317.75	0.1914	0.1896	0.1898
	320.85	0.2109	0.2095	0.2096
	324.35	0.2344	0.2339	0.2339
	328.85	0.2671	0.2685	0.2684
	331.35	0.2865	0.2895	0.2892
	100ARD	0.3172	1.3703	1.2757
	$\Phi_2=0.20$			
	277.75	0.0213	0.0257	0.0256
	283.75	0.0302	0.0339	0.0338
	287.35	0.0368	0.0399	0.0397
	288.95	0.0401	0.0428	0.0427
	292.35	0.0477	0.0495	0.0494
	294.75	0.0537	0.0548	0.0547
	298.65	0.0644	0.0644	0.0644
	302.55	0.0766	0.0754	0.0754
	305.45	0.0866	0.0846	0.0846
	309.25	0.1009	0.0979	0.0980
	312.95	0.1162	0.1126	0.1127
	317.65	0.1375	0.1338	0.1339
	323.45	0.1665	0.1643	0.1644
	328.15	0.1922	0.1931	0.1932
	331.55	0.2118	0.2165	0.2163
	100ARD	-0.2130	2.5348	2.4218
	$\Phi_2=0.30$			
	275.55	0.0130	0.0153	0.0152
	282.35	0.0195	0.0216	0.0215
	287.95	0.0266	0.0282	0.0282
	292.55	0.0339	0.0350	0.0349
	296.05	0.0404	0.0410	0.0409
	301.25	0.0517	0.0515	0.0515
	303.85	0.0582	0.0576	0.0576
	307.65	0.0686	0.0675	0.0676
	313.25	0.0864	0.0848	0.0849

Solvent	T/K	10x(alp)	10x(sim)	10x(λ h)
Water(1) + Methanol(2)	316.65	0.0987	0.0970	0.0971
	321.55	0.1183	0.1172	0.1172
	325.45	0.1357	0.1356	0.1356
	330.25	0.1592	0.1615	0.1615
	100ARD	-0.5330	1.9587	1.8492
	$\Phi_2=0.40$			
	282.55	0.0127	0.0136	0.0136
	286.85	0.0160	0.0167	0.0167
	292.55	0.0213	0.0219	0.0218
	296.85	0.0262	0.0265	0.0265
	302.05	0.0333	0.0333	0.0333
	305.85	0.0393	0.0392	0.0392
	308.75	0.0445	0.0442	0.0442
	312.75	0.0525	0.0520	0.0520
	316.35	0.0605	0.0599	0.0600
	320.55	0.0710	0.0705	0.0705
	325.35	0.0847	0.0845	0.0845
	331.45	0.1046	0.1055	0.1054
	100ARD	-0.4110	0.5922	0.5605
	$\Phi_2=0.50$			
	291.15	0.0130	0.0135	0.0135
	297.05	0.0169	0.0172	0.0172
	301.65	0.0205	0.0207	0.0207
	305.25	0.0238	0.0238	0.0238
	310.35	0.0290	0.0288	0.0288
	314.65	0.0341	0.0338	0.0338
	318.75	0.0394	0.0391	0.0391
	322.55	0.0449	0.0447	0.0447
	328.15	0.0540	0.0540	0.0540
	332.25	0.0614	0.0618	0.0618
	100ARD	-0.0300	0.4222	0.4222
$\Phi_2=0.05$				
Water(1) + Ethanol(2)	277.65	0.0468	0.0484	0.0481
	281.45	0.0557	0.0570	0.0568
	285.65	0.0671	0.0681	0.0679
	288.55	0.0760	0.0767	0.0766
	291.45	0.0858	0.0863	0.0861
	295.15	0.0998	0.0998	0.0998
	298.35	0.1132	0.1129	0.1129
	302.15	0.1309	0.1303	0.1304
	307.05	0.1569	0.1559	0.1561
	310.05	0.1746	0.1735	0.1737
	314.65	0.2047	0.2036	0.2038

Solvent	T/K	10x(alp)	10x(sim)	10x(λ h)	
Water(1) + Ethanol(2)	318.25	0.2309	0.2300	0.2302	
	323.85	0.2765	0.2765	0.2766	
	328.75	0.3215	0.3233	0.3229	
	100ARD	0.1792	0.6429	0.5525	
	$\Phi_2=0.10$				
	282.75	0.0567	0.0597	0.0595	
	288.45	0.0712	0.0733	0.0732	
	294.45	0.0893	0.0904	0.0903	
	296.25	0.0953	0.0960	0.0960	
	299.95	0.1086	0.1086	0.1086	
	306.05	0.1331	0.1321	0.1321	
	307.15	0.1379	0.1368	0.1368	
	313.45	0.1676	0.1659	0.1660	
	316.05	0.1810	0.1793	0.1793	
	319.65	0.2007	0.1992	0.1992	
	322.05	0.2145	0.2133	0.2134	
	327.15	0.2458	0.2461	0.2461	
	332.35	0.2804	0.2834	0.2833	
	100ARD	0.0577	0.5688	0.5370	
	$\Phi_2=0.20$				
	286.55	0.0501	0.0534	0.0533	
	290.45	0.0601	0.0626	0.0625	
	293.65	0.0693	0.0711	0.0710	
	296.45	0.0782	0.0793	0.0792	
	300.25	0.0915	0.0916	0.0915	
	305.95	0.1142	0.1129	0.1130	
	311.15	0.1381	0.1359	0.1360	
	314.85	0.1569	0.1544	0.1545	
	316.95	0.1682	0.1658	0.1659	
	321.85	0.1967	0.1950	0.1951	
	324.05	0.2103	0.2094	0.2095	
	327.75	0.2344	0.2356	0.2356	
	330.55	0.2536	0.2571	0.2569	
	100ARD	0.1983	0.9664	0.9320	
	$\Phi_2=0.30$				
	280.75	0.0273	0.0308	0.0307	
	283.65	0.0319	0.0350	0.0349	
	287.95	0.0397	0.0420	0.0420	
	292.55	0.0495	0.0509	0.0508	
	295.55	0.0567	0.0575	0.0574	
	299.15	0.0664	0.0663	0.0663	
	301.85	0.0743	0.0736	0.0736	
	304.35	0.0822	0.0810	0.0810	

Solvent	T/K	10x(alp)	10x(sim)	10x(λ h)
Water(1) + Ethanol(2)	306.95	0.0910	0.0892	0.0893
	311.05	0.1061	0.1037	0.1038
	316.05	0.1265	0.1239	0.1240
	320.95	0.1486	0.1468	0.1469
	325.55	0.1712	0.1712	0.1713
	330.35	0.1967	0.2002	0.2001
	100ARD	-0.4760	1.1368	1.0891
	$\Phi_2=0.40$			
	288.55	0.0209	0.0244	0.0243
	295.25	0.0312	0.0336	0.0335
	300.05	0.0405	0.0419	0.0419
	303.35	0.0480	0.0486	0.0485
	306.05	0.0549	0.0547	0.0547
	309.05	0.0632	0.0622	0.0622
	313.15	0.0757	0.0740	0.0740
	317.55	0.0909	0.0886	0.0886
	320.05	0.1002	0.0979	0.0980
	324.15	0.1165	0.1150	0.1151
	328.95	0.1373	0.1382	0.1382
	331.15	0.1473	0.1500	0.1500
	100ARD	0.5219	2.3084	2.2392
	$\Phi_2=0.50$			
	288.55	0.0162	0.0162	0.0162
	292.65	0.0197	0.0197	0.0197
	297.65	0.0248	0.0248	0.0248
	302.55	0.0309	0.0309	0.0309
	308.85	0.0405	0.0404	0.0404
	316.05	0.0544	0.0543	0.0543
	319.95	0.0634	0.0634	0.0634
	323.05	0.0715	0.0715	0.0715
	325.45	0.0784	0.0783	0.0783
	331.55	0.0982	0.0983	0.0982
	100ARD	0.5672	0.5230	0.5129
$\Phi_2=0.05$				
Water(1) + 2-Propanol(2)	276.45	0.0449	0.0503	0.0500
	280.95	0.0557	0.0603	0.0600
	284.95	0.0669	0.0705	0.0703
	290.05	0.0834	0.0856	0.0854
	294.35	0.0994	0.1002	0.1001
	299.05	0.1192	0.1185	0.1184
	302.95	0.1375	0.1356	0.1356
	307.25	0.1598	0.1567	0.1568
	310.95	0.1806	0.1769	0.1771

Solvent	T/K	10x(alp)	10x(sim)	10x(λ h)
Water(1) + 2-Propanol(2)	316.85	0.2172	0.2134	0.2136
	320.35	0.2409	0.2378	0.2380
	324.45	0.2703	0.2690	0.2692
	328.65	0.3023	0.3044	0.3043
	331.45	0.3247	0.3299	0.3297
	100ARD	-0.1120	1.4318	1.3186
	$\Phi_2=0.10$			
	274.75	0.0306	0.0365	0.0362
	279.95	0.0409	0.0459	0.0457
	283.65	0.0496	0.0538	0.0536
	288.55	0.0631	0.0660	0.0658
	292.75	0.0767	0.0781	0.0780
	295.35	0.0861	0.0866	0.0865
	299.35	0.1020	0.1010	0.1010
	302.85	0.1174	0.1152	0.1152
	307.15	0.1382	0.1348	0.1349
	311.75	0.1630	0.1587	0.1589
	315.95	0.1877	0.1836	0.1838
	319.95	0.2131	0.2100	0.2102
	322.55	0.2305	0.2288	0.2290
	327.35	0.2645	0.2672	0.2671
	329.55	0.2808	0.2864	0.2862
	100ARD	-0.4290	1.9711	1.8385
	$\Phi_2=0.20$			
	280.75	0.0256	0.0295	0.0293
	287.35	0.0376	0.0407	0.0405
	289.95	0.0434	0.0459	0.0458
	292.65	0.0501	0.0520	0.0519
	296.45	0.0608	0.0618	0.0617
	297.65	0.0644	0.0651	0.0651
	301.65	0.0779	0.0776	0.0775
	304.25	0.0877	0.0867	0.0867
	307.75	0.1022	0.1003	0.1004
	310.85	0.1164	0.1139	0.1140
	314.85	0.1365	0.1336	0.1338
	318.15	0.1547	0.1520	0.1522
	322.45	0.1805	0.1791	0.1793
	325.25	0.1987	0.1989	0.1989
	329.75	0.2301	0.2344	0.2342
	100ARD	0.0516	1.8475	1.7460
	$\Phi_2=0.30$			
	281.15	0.0170	0.0214	0.0212
	285.25	0.0223	0.0262	0.0261

Solvent	T/K	$10x(\text{alp})$	$10x(\text{sim})$	$10x(\lambda h)$
Water(1) + 2-Propanol(2)	288.95	0.0280	0.0314	0.0312
	293.05	0.0356	0.0381	0.0380
	298.15	0.0470	0.0481	0.0480
	302.65	0.0590	0.0587	0.0586
	306.05	0.0693	0.0679	0.0680
	309.55	0.0810	0.0788	0.0788
	313.15	0.0944	0.0914	0.0914
	316.15	0.1064	0.1031	0.1032
	320.15	0.1237	0.1208	0.1209
	324.25	0.1428	0.1415	0.1415
	327.95	0.1612	0.1626	0.1626
	330.45	0.1741	0.1783	0.1782
	100ARD	0.0248	3.7614	3.5679
	$\Phi_2=0.40$			
	283.05	0.0124	0.0139	0.0139
	287.35	0.0164	0.0178	0.0177
	293.45	0.0238	0.0248	0.0247
	299.05	0.0327	0.0332	0.0332
	302.45	0.0393	0.0395	0.0395
	305.45	0.0460	0.0458	0.0458
	308.35	0.0533	0.0528	0.0528
	311.55	0.0624	0.0615	0.0616
	314.85	0.0728	0.0718	0.0719
	319.65	0.0904	0.0895	0.0895
	323.35	0.1059	0.1055	0.1055
	328.95	0.1329	0.1343	0.1343
	100ARD	-0.7050	1.0280	0.9723
	$\Phi_2=0.50$			
	289.55	0.0155	0.0169	0.0169
	295.95	0.0215	0.0224	0.0224
	299.15	0.0251	0.0257	0.0257
	303.65	0.0309	0.0310	0.0310
	308.15	0.0375	0.0371	0.0371
	311.75	0.0434	0.0428	0.0428
	316.65	0.0525	0.0516	0.0516
	319.55	0.0584	0.0575	0.0575
	322.95	0.0657	0.0651	0.0651
	327.35	0.0761	0.0762	0.0762
	330.85	0.0849	0.0861	0.0861
	100ARD	-0.1060	0.8521	0.8521